

Entrelazamiento cuántico, propagadores de polarización y parámetros espectroscópicos de la RMN

RESUMEN

Esta tesis nace de la motivación de corroborar una hipótesis planteada en el año 2010 por Gustavo Aucar y colaboradores. La misma sugiere que la regla de Karplus debe su origen electrónico a un nuevo tipo de entrelazamiento cuántico entre las excitaciones que se producen naturalmente en un sistema molecular. Debido a la falta de una definición formal del fenómeno de entrelazamiento cuántico dentro del formalismo de propagadores de polarización, dicha hipótesis no pudo ser verificada previamente.

A raíz de eso, desarrollamos un método que permite cuantificar el entrelazamiento dentro del formalismo de propagadores de polarización. El mismo parte de definir una matriz densidad dentro de ese formalismo que, mediante el uso de la entropía de von Neumann, permite evaluar el grado de correlación cuántica entre dos pares de excitaciones moleculares.

Con el objetivo de encontrar una relación entre la regla de Karplus y el entrelazamiento, se estudiaron pares de excitaciones que tuvieran lugar en orbitales separados por un enlace intermedio. Para esto, se hizo uso del método CLOPPA el cual permite evaluar las contribuciones de los orbitales moleculares localizados a propiedades de respuesta lineal. Encontramos que en dos de los tres sistemas estudiados, el valor del entrelazamiento produce una curva tipo Karplus al variar el ángulo diedro entre los orbitales seleccionados. Esto sugiere que el fenómeno de

entrelazamiento podría ser el mecanismo que subyace a la regla de Karplus.

A su vez, los resultados obtenidos despejaron las dudas sobre uno de los temas más controvertidos con respecto al formalismo de propagadores de polarización. El vínculo que existe entre el entrelazamiento cuántico y la correlación electrónica indica que efectivamente el nivel de aproximación RPA incluye correlación electrónica.

Hasta el momento solo se consideró el entrelazamiento entre estados cuánticos. La posibilidad de entrelazar excitaciones abre una nueva área de estudio para las propiedades de respuesta. Esta tesis se enfoca en la descripción de estos fenómenos novedosos de los sistemas moleculares, de la cual el entrelazamiento cuántico juega un papel fundamental.